(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum Internationales Büro





(43) Internationales Veröffentlichungsdatum 24. Februar 2005 (24.02.2005)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer WO 2005/017533 A1

(71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme von US): PROTEROS BIOSTRUCTURES GMBH

(51) Internationale Patentklassifikation⁷: B01J 19/00, C30B 7/00

G01N 33/68,

(21) Internationales Aktenzeichen:

PCT/EP2004/008813

(22) Internationales Anmeldedatum:

6. August 2004 (06.08.2004)

(25) Einreichungssprache:

Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache:

Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:

103 36 110.3 04001722.0 6. August 2003 (06.08.2003) DE

27. Januar 2004 (27.01.2004) EP

[DE/DE]; Am klopferspitz 19, 82152 Martinsried (DE).

(72) Erfinder; und

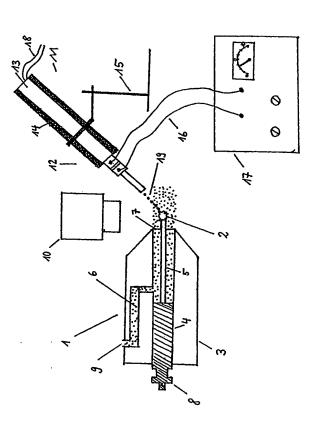
(75) Erfinder/Anmelder (nur für US): NEUEFEIND, Torsten [DE/DE]; Am Weiher 3a, 82131 Gauting (DE). BRAND-STETTER, Hans [DE/DE]; Am Weiher 25, 82131 Gauting (DE). KIEFERSAUER, Reiner [DE/DE]; Brodwastlweg 9, 82061 Neuried (DE).

(74) Anwälte: GRAF VON STOSCH, Andreas usw.; Bosch, Graf von Stosch, Jehle, Flüggenstr. 13, 80639 München (DE).

[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

(54) Title: METHOD FOR IDENTIFYING WEAKLY BINDING MOLECULE FRAGMENTS HAVING LIGAND PROPERTIES, WHEREBY THE MOLECULE FRAGMENTS ARE APPLIED IN THE FORM OF MICRODROPS OF A CORRESPONDING SOLUTION TO THE CRYSTAL

(54) Bezeichnung: VERFAHREN ZUR IDENTIFIZIERUNG VON SCHWACH BINDENDEN MOLEKÜLFRAGMENTEN MIT LIGANDENEIGENSCHAFTEN, WOBEI DIE MOLEKÜLFRAGMENTE ALS MIKROTROPFEN EINER ENTSPRECHENDEN LÖSUNG AUF DEN KRISTALL AUFGEBRACHT WERDEN



- (57) Abstract: The invention relates to a method for treating a crystal with a solution, whereby the solution contains one or more molecular species and the molecules of the molecular species typically have a molecular weight of < 500 Da. The use of this method enables weakly binding small molecules or molecule fragments to be identified on target structures and their binding position to be determined by subsequent x-ray crystallographic examinations.
- (57) Zusammenfassung: Die vorliegende Erfindung betrifft ein Verfahren zuin Behandeln eines Klistalls rnit einer Lösung, wobei die Lösung eine oder mehr Molekülspezies enthält und wobei die Moleküle der Molekülspezies typischerweise ein Molekulargewicht von < 500 Da aufweisen. Mit Hilfe diese Verfahrens können auf Targetstrukturen schwach bindende kleine Moleküle oder Molekülftagmente identifiziert und deren Bindungsposition durch nachfolgende röntgenkristallographische Untersuchungen ermittelt werden.

WO 2005/017533 A1

- (81) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare nationale Schutzrechtsart): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.
- (84) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG,

ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Veröffentlicht:

mit internationalem Recherchenbericht

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.